

高太长, 胡帅, 李浩, 等. 气溶胶光散射数值模拟的研究现状及进展. 气象科学, 2017, 37(5): 598-609.

GAO Taichang, HU Shuai, LI Hao, et al. Actuality and prospect of aerosol scattering numerical simulation techniques. Journal of the Meteorological Sciences, 2017, 37(5): 598-609.

气溶胶光散射数值模拟的研究现状及进展

高太长¹ 胡帅¹ 李浩¹ 刘磊¹ 刘西川¹ 李刚²

(1 国防科技大学 气象海洋学院, 南京 211101; 2 中国洛阳电子装备实验中心, 洛阳 471000)

摘要 气溶胶光散射信息是辐射传输模拟、气候学研究及大气海洋遥感等的重要前提, 由于其基础性地位, 气溶胶光散射数值模拟一直是大气科学领域的研究热点。本文简明扼要地对气溶胶光散射数值模拟技术的研究现状进行了综述, 主要内容包括以下3个方面: (1) 总结和分析了 Mie 散射理论在实际应用的局限性; (2) 对气溶胶光散射理论进行了归类, 概述了其发展历程、研究现状, 重点分析了不同散射理论的基本原理、适用范围、算法复杂度及相应的优缺点; (3) 总结了气溶胶光散射研究中存在的问题, 扼要地概括了气溶胶光散射数值模拟的研究热点及发展方向。

关键词 气溶胶; 光散射; 非球形散射理论

分类号 X513

doi: 10.3969/2016jms.0054

文献标识码: A

Actuality and prospect of aerosol scattering numerical simulation techniques

GAO Taichang¹ HU Shuai¹ LI Hao¹ LIU Lei¹ LIU Xichuan¹ LI Gang²

(1 College of Meteorology and Oceanography, National University of Defense Technology, Nanjing 211101, China;

2 Luoyang Electronic Equipment Testing Centre, Luoyang 471000 China)

Abstract Aerosol scattering properties are the important basis for radiative transfer simulation, climate research and remote sensing of atmosphere and ocean. For its basic standing, how to obtain the scattering characteristics of aerosol has become the international hotspot of atmospheric research. In this paper, the actuality and progress of the study on aerosol scattering numeral simulation techniques are introduced concisely, and the main content can be divided into three parts, shown as follows: (1) the disadvantages of Mie scattering theory are concluded and analyzed. (2) Existed scattering theories are classified into several groups, and their development history and actuality are introduced, in this part, the basic principle, applicable scope (including particle shape, size, refraction index, etc.), computation complexity, merit and demerit of each scattering model, which are helpful for the selection of suitable scattering model for certain applications, was emphazely analyzed. (3) The problems existed in the scattering numeral techniques are summarized, and the corresponding research hotspots and development trend are concluded as well.

Key words Aerosol; Light scattering; Nonspherical scattering theory

收稿日期 (Received): 2016-04-20; 修改稿日期 (Revised): 2016-07-25; 网络出版日期 (Published on-line): 2017-10-19

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/32.1243.P.20171019.1122.008.html>

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (41575025)

通信作者 (Corresponding author): 胡帅 (HU Shuai). hushuai2012@hotmail.com

引 言

气溶胶的光散射过程是影响大气辐射传输过程的重要因素^[1],气溶胶散射特性的变化可改变地球大气系统的行星反照率,进而影响地气系统的能量平衡^[2-3]。对比多年来的 IPCC 报告可发现^[4],气溶胶直接辐射强迫的评估精度虽然有所提高,但仍存在较大不确定性($-0.9 \sim -0.1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$),其中制约评估精确性的一个重要方面就是气溶胶散射特性的不确定性,特别是气溶胶和卷云中冰晶等非球形粒子的散射特性^[5-6]。尽管目前许多学者尝试并建立了描述气溶胶光散射特性的数据库^[7],辐射传输模式中的气溶胶类型也日益繁多,但由于气溶胶形状、化学组分及尺度谱等微物理参数的复杂性,这些数据库并无法囊括所有气溶胶的散射特征^[2, 8],这必然造成辐射传输过程的模拟误差^[9]。因此系统了解气溶胶粒子的光散射特性及其对辐射传输模拟的影响是目前急需解决的问题^[10]。

随着卫星遥感技术的发展,大气海洋遥感正朝着高时空分辨率、高光谱、多角度和多极化的方向发展^[11],特别随着 POLDER/PARASOL 等遥感器的应用,使得遥感信息量由三维(光强、光谱和空间)拓展到了七维(光强、光谱、空间、偏振度、偏振方位角、偏振椭圆率和旋转的方向)^[12],极大延伸了传统大气遥感技术的探测能力。偏振遥感技术需要以矢量辐射传输模式为基础,目前考虑多次散射的矢量辐射传输模型,如 RT3/PolRadtran、VDISORT、SOSVRT 及 SHDOM 等已得到广泛检验^[13-14],但在作为模式输入参数的 Müller 散射矩阵仍主要通过 Mie 散射计算得到,并未充分考虑气溶胶及冰晶粒子的非球形效应;而实际上,非球形粒子的散射特性与 Mie 散射理论模拟值存在较大差异^[15-16],这将影响正演模型的准确性,进而影响遥感反演结果精度^[17],因此准确获取非球形气溶胶的散射特性已成为提高大气及海洋遥感精度的重要基础^[18]。

由于气溶胶散射特性的重要性,非球形气溶胶的光散射数值模拟技术一直是国际上研究的焦点和前沿课题。本文对气溶胶光散射数值模拟技术的发展历程及研究现状进行扼要综述,并对其中的关键问题进行了分析。本文的行文思路是:首先分析了采用 Mie 散射理论模拟气溶胶散射特性的缺陷,指出建立非球形气溶胶散射模型的必要性;第二部分总结了现有的非球形气溶胶粒子散射理论模型,并对其基本原理、适用范围、算法复杂度及优

缺点进行了扼要的阐述;最后对气溶胶散射数值模拟及测量技术研究中存在的问题及其发展动向进行了总结和展望。

1 球形散射理论的发展及其在实际应用中的局限性

均质球形粒子的散射模型是在 1908 年由德国 G. Mie 和丹麦 L. Lorenz 同期独立提出的,他们在球形边界条件下,通过精确求解 Maxwell 方程组得到了粒子的光散射特性,因此,均质球体的散射又简称为 Mie 散射或 Lorenz-Mie 散射。Mie 散射理论最初只适用于表面平滑的球形均质粒子,Aden, et al^[19]对其进行了改进,进一步建立了适用于分层均匀球体的 Mie 散射模型,又称为 Aden-Kerker 散射理论。

Mie 散射理论简单实用,因此广泛用于气溶胶散射特性的模拟,但对于非球形粒子,它的模拟结果存在一定局限性。为了方便对非球形粒子的处理,通常采用等体积法和等表面积法将其等效为球形粒子进行计算,但大量实验证明,在该近似条件下,非球形气溶胶的散射特性与 Mie 理论模拟值存在较大偏差。Hoyningen-Huene, et al^[20]曾经证明,Mie 散射模型计算的非球形粒子散射能量误差高达 60%;Curtis, et al^[21]通过矿质型气溶胶多角度散射特性的测量实验发现,在侧后向散射方向,Mie 散射理论的相函数计算值要明显高于实际测量值,实际散射光的偏振度也明显偏离 Mie 理论模拟值。此外,由于忽略了粒子形状的影响,Mie 散射无法模拟晕圈、弧光、太阳(月亮)光柱等光学现象^[22]。当然由于不考虑粒子的形状特征,Mie 散射理论无法准确模拟非球形气溶胶的 Müller 散射矩阵,因此它也无法有效解释粒子非球形性导致的散射光退偏振效应,如激光雷达探测气溶胶及冰晶云时,后向散射光的退偏振效应就无法用 Mie 散射理论解释^[22]。

2 粒子光散射特性的近似模型

粒子光散射特性的近似模型主要针对粒子尺度参数较为极端的情形,如当入射光波长远远大于粒径或入射光波长远远小于粒径的情况。如表 1 所示,其中,针对第一种情形较典型的模型包括 Rayleigh 散射近似和 Rayleigh-Gans-Stevenson 近似;针对第二种情形较典型的模型包括异常衍射近似模型和几何光学近似模型。

2.1 入射光波长远远大于粒径情形(尺度参数 $x \ll 1$)

Rayleigh 散射近似模型(RA)首先由 Rayleigh 在 1897 年提出,主要针对粒径远小于入射光波长的粒子。在该模型求解过程中需要假设粒子的内场及入射场近似为静电场,且粒子内场是均匀的。对于一些简单形状粒子(如椭球形),RA 模型是存在完全解析解的;但对于复杂形状粒子,RA 模型的解仍需要对考虑极化矢量的积分方程进行简单数值求解得到。针对随机取向的椭球形粒子,Bohren, et al^[23]进一步研究了 Rayleigh 散射近似的适用范围。Jones^[24]对 RA 模型进行了改进,使之适用于球形粒子簇的散射特性模拟。

Rayleigh-Gans-Stevenson 近似(RGA)是 Rayleigh 近似的增强版,由 Stevenson^[25]在 1953 年提出,其改进之处在于将入射场与散射场的基函数展开阶数增加至了尺度参数的 4 次方(RA 仅为二次展开)。为获取解析解,在该模型中,需要假设散射体中各微元仅受入射场激发而散射,而与其它因素无关。目前该模型主要是适用于粒径较小的光学“软”粒子(折射率 m 满足 $|m-1| \ll 1$,即光线在粒子边界的折射及反射过程基本可忽略),相对于 Rayleigh 近似,其所适用的尺度参数范围有所增加。经过许多学者不断的拓展,目前该模型可适用的形状包括椭球体、圆柱体、各向异性粒子及表面为高斯随机面的粒子等^[26]。

2.2 入射光波长远小于粒径情形(尺度参数 $x \gg 1$)

异常衍射近似(The Anomalous Diffraction Approximation, ADA)最初由 Hulst^[27]提出并用于计算粒子消光截面,因此又叫 van de Hulst 近似。该模型主要适用于尺度参数很大的光学软粒子($x \gg 1$, $|m-1| \ll 1$, m 为折射率),其中,粒子的消光效应通过粒子对光线的吸收及光在粒子内部及外部的干涉过程共同贡献。经过多年发展,该模型既可适用于形状比较复杂的粒子,也可半经验地模拟较小尺度参数和较大折射指数粒子的光散射特性。目前 ADA 适用的粒子形状主要包括棱柱、六角形冰晶、椭球体、有限圆柱体及正方体等,Meeten^[28]和 Khlebtsov^[29]对 ADA 模型进行了拓展,使之可用于各向异性粒子及分型团簇型粒子(fractal clusters)散射过程的模拟。对于不同形状的粒子,ADA 模型模拟精度并不一致,其中 LIU, et al^[30]通过比较 ADA 和 T 矩阵的计算结果发现,ADA 在随机取向椭球形粒子情形下的模拟精度高于球形粒子情形,并且 ADA 的吸收系数模拟误差随复折射率虚部的增加而增加。与 ADA 模型相似的是 EA 模型(Eikonal Approximation),两者的本质差别在于在标量散射函数表达式中,EA 位相中的 (m^2-1) 被在 ADA 中的 $2(m-1)$ 所代替,对于光学软粒子,两者是近似等价的,两者可以视为基本相同,但对于相对折射率偏离 1 较大时,该等价性就不成立了^[31]。Mitchell^[32]

表 1 非球形粒子散射特性近似计算模型

Table 1 Approximation scattering models for nonspherical aerosol particles					
模型	发展者	适用范围	粒子类型	优点	缺点
RA	Rayleigh	$x \ll 1$	- 要求粒子尺度远小于波长 - 目前解析解形式只存在于一些简单形状,如椭球,球形及球形簇等	- 对于简单形状存在完全解析解; - 对于复杂形状粒子只需要通过简单数值求解过程。	- 需要粒子为均匀粒子,且尺度远小于波长; - 需假设粒子内部及周边入射场是近似静电场。
RGA	Stevenson ^[25]	$x m-1 \ll 1$ 且 $ m-1 \ll 1$ (optical soft)	- 要求粒子尺度远小于波长 - 光学软粒子	- 存在解析解; - 粒子尺度范围比 Rayleigh 近似要大。	仅适用于粒径远小于波长的粒子。
ADA 和 MADA	van de Hulst	$x \gg 1$ 且 $ m-1 \ll 1$ (光学软粒子)	理论上适用于任何形状的粒子	- 适用于大尺度光学软粒子的光散射模拟,具有算法快速和较精确等优点; - MADA 具有计算更加简单和更加精确等优点。	- 仅适用于粒子半径远大于波长的粒子; - 不能计算散射相函数图案。
GOA	Liou, et al ^[36] Liou, et al ^[33]	$x \gg 1$	- 理论上适用于任何形状的粒子 - 目前主要用于冰晶粒子散射特性模拟	- 概念比较简单,实现很方便; - 目前解决较大粒子散射唯一较为实用的方法。	- 不适用于小粒子光散射模拟; - 要非常注意模型的使用下限 $x_{\min}$,针对不同吸收特性及形状的粒子, $x_{\min}$ 也存在差异。

进一步提出了改进异常衍射近似 (Modified Anomalous Diffraction Approximation, MADA),它是 ADA 的一种特殊改进形式,可对任意形状粒子导出一个非常简单的 ADA 表达式。与 ADA 相比,MADA 具有计算更简单和更精确等优点,在几何光学中,MADA 更适合计算大气粒子的消光和吸收特性。值得注意的是,ADA 近似无法模拟散射相函数图像;对于冰晶等粒子,由于其折射率并不趋近于 1,因此采用 ADA 进行模拟时,要对其精度进行检验。

几何光学近似(Geometric Optics Approximation, GOA),特别是基于射线追踪技术的 GOA 也广泛用于尺度参数远大于 1 的大粒子的光散射特性模拟^[5]。常规几何光学近似的基本思想是:假设散射场由衍射光、反射光及折射光组成,将入射平面波作为分立平行光线的集合,通过 Snell 定律和 Fresnel 方程模拟光线在粒子内部及外部的折射和反射过程,通过夫琅禾费衍射原理处理衍射过程,通过在一定立体角区间内对各条光线的贡献进行平均获得散射光能量分布^[5]。由于夫琅禾费衍射公式不能解释电磁场的偏振性质,且对光线追踪得到的远场直接进行统计计算还将导致散射能量的不连续分布,为避免上述问题,Liou, et al^[33]发展了改进的几何光学方法,其基本思想是将粒子平面内由几何射线追踪得到的能量分布收集起来,并按照精确的、特定的几何光线追踪轨迹映射到远场,从而避免对反射和折射能量的立体角平均。传统的 GOA 方法是忽略粒子吸收效应的,但这对于强吸收粒子并不成立,为在模拟过程中引入吸收过程,Stratton^[34]和 Born, et al^[35]将传统折射率概念拓展为复折射率,采用折射率虚部表征粒子的吸收特性,并据此定义了新的菲涅尔反射系数和折射系数,实现了考虑吸收效应的几何光学近似。Liou, et al^[36]第一个在射线追踪技术中考虑了极化效应和位相干涉,基于偏振矢量和不同的坐标系发展了几何射线追踪算法。我国学者也在这方面做出了许多贡献^[37-39],如 XU, et al^[38]应用 GOA 处理随机取向和水平取向六角柱状和盘状粒子的光散射;ZHANG, et al^[39]基于 GOA 方法研究了粒子的吸收,并讨论了冰晶粒子吸收对散射特性的影响。

在光散射计算中,应用蒙特卡罗法 (Monte Carlo) 可有效地处理复杂粒子问题,因此,为了加速计算,可将 GOA 算法与蒙特卡罗法联合使用,称为 Monte Carlo 射线追踪算法^[22]。该方法首先由 Wending, et al^[5]提出,主要用于六角形冰柱及冰板的散

射特性计算;为实现光波吸收特性和偏振特性的模拟,Liou, et al^[33]对该方法进行一定的改进。

几何光学近似理论上可适用于任何形状大粒子的散射特性模拟,但它本质还是一种针对极端情形的近似方法,在实际使用时,要非常注意其适用的尺度参数下限 $x_{\min}$ 。Hansen, et al^[40]比较了 Mie 散射理论及 GOA 的计算结果,发现 $x_{\min}$ 需要达到数百时,GOA 方可使用。针对随机取向的椭球形及有限长的圆柱形粒子,Macke, et al^[41]和 Wielaard, et al^[42]进一步对比了 GOA 和 T 矩阵法的相函数模拟结果,发现对于吸收特性中等的粒子, $x_{\min}$ 需要达到 80,随着粒子吸收特性减弱, $x_{\min}$ 也随着增加;如果要精确计算 Müller 矩阵,那么 $x_{\min}$ 将大得多。

3 非球形粒子散射特性的精确求解模型

散射精确求解模型是指通过在一定边界条件下直接数值求解电波传播方程,如 Maxwell 方程组及亥姆霍兹方程等,获得粒子电磁散射特性的一类方法。按照计算原理,常见的非球形散射理论及模型可大致分为基于场展开方式的散射模型、基于体积分方程的散射模型及基于微元法的散射模型 3 类,各模型的适用范围、粒子类型、算法复杂度及相应的优缺点如表 2 所示。

3.1 基于矢量波函数场展开的散射计算模型

基于基函数展开的散射模型的特点是基于某种矢量波函数对电磁入射场、内场及散射场进行展开,然后在特定边界条件下通过求解微分方程或积分方程建立入射场与散射场展开系数的关系,从而实现对散射过程的求解。这一类模型主要包括 T 矩阵法 (T Matrix Method), 扩展边界条件法 (Extended Boundary Condition Method, EBCM), 分离变量法 (Separation of Variables Method, SVM) 和点匹配法 (Point Matching Method, PMM) 等。目前常用于电磁场展开的矢量波函数有 3 类,即矢量球面波函数、矢量圆柱状波函数和矢量椭球波函数。

T 矩阵法。T 矩阵法最早由 Waterman^[43]提出,其基本原理是,用矢量椭球波函数将入射场、内场及散射场展开,由于 Maxwell 方程组和边界条件是线性的,因此散射场的展开系数可通过 T 矩阵对入射场的展开系数线性变换得到,其中 T 矩阵是入射场到内场的变换矩阵 Q 和内场到散射场的变换矩阵 RgQ 组合得到的 ($T = -RgQ \times Q^{-1}$), 矩阵 Q 和 RgQ 是通过球面矢量波函数的乘积在粒子表面积分得到的,两者仅取决于粒子的尺度、形状和复折射率^[44]。

表 2 非球形粒子散射特性的精确计算模型
Table 2 Accurate calculation model for non-spherical aerosol particles

模型	发展者	适用范围	粒子类型	计算复杂度	优点	缺点
SVM	Oguchi ^[52] Asano, et al ^[53]	$x < 40$	主要用于长/扁椭球均质粒子,也可适用于一些非均质粒子的计算(如层状粒子)	$O(x^3) \sim O(x^4)$	• 计算精度非常高; • 可实现大轴比椭球形粒子的散射特性模拟。	• 存在散射场及内部场展开系数的截断误差; • 特别当粒子半径及折射率较大时,数值求解过程存在不稳定性。
FEM	Morgan, et al ^[63]	$x < 10$	适用于任意形状的非均质粒子	• 基于高斯消去法 (GE) $O(x^7)$ • 基于共轭梯度法 (CGM) $O(x^4)$	• 适用于任意复杂形状的非均质的粒子; • 概念简单,易于实现; • 避免了积分方程方法的奇异核问题。	• 适用的粒子尺度较小,且计算精度不高; • 计算量大,消耗内存高,对于不同状态入射光(偏振、入射方向等),涉及重复计算。
FDTD、MRTD和PSTD	Yee ^[64] Taflove ^[65] YANG, et al ^[81] LIU, et al ^[85]	$x < 20$ $x < 200$ (PSTD)	适用于任意形状的非均质粒子	$O(x^7)$	• 适用于任意复杂形状的非均质的粒子; • 易于理解和实现; • 避免了积分方程方法的奇异核问题。	• 适用的粒子尺度较小,且计算精度不高; • 计算量大,消耗内存高,对于不同状态的入射光(偏振、入射方向等),涉及重复计算。
T 矩阵法	Waterman ^[43] Mishchenko ^[26]	$x < 180$	主要用于旋转对称型粒子(椭球、圆柱及切比雪夫粒子等),也可适用于多层散射体,偏心夹杂粒子和球体粒子簇等	对于旋转对称散射体: $O(x^3) \sim O(x^4)$	• 计算精度高,速度快,特别适用于旋转对称粒子; • 可信度高,已经被广泛检验。	• 当粒子尺度参数较大,形状较为极端或折射率较大时,容易出现数值求解的不稳定性。
DDA和MoM	Harrington ^[66] Draine, et al ^[67]	适用于小粒子的散射问题	适用于任意形状的非均质粒子	• 基于高斯消去法: $O(x^9)$ • 基于共轭梯度法和快速傅里叶变换: $O(x^{3+3n} \log x)$	• 可适用于任意形状、非均质及各向异性的粒子; • 散射条件自动满足。	• 计算精度不高; • 计算粒子尺度不能太大; • 计算复杂度高,内存消耗大; • 对于不同状态的入射光(偏振、入射方向等),涉及重复计算。
PMM和GPMM	Oguchi ^[59]	适用于大粒子	适用于比较简单的粒子的形状和结构	$O(x^3) \sim O(x^4)$	• 计算结果相对比较精确	• 需满足 Rayleigh 假设,否则计算结果可能不精确,数值计算过程存在不稳定性; • 由于采用球面矢量波函数展开,仅适用一些简单的形状和结构。
FIEM	Holt, et al ^[68]	多数 $x < 5$	椭球体、有限圆柱体及椭球链	$O(x^7)$	• 对于不同状态的入射光,不需要进行重复性计算	• 适用粒子尺度参数范围很窄; • 计算复杂度高,对于不同形状,算法一致。
SM	Bruning, et al ^[69]	$x < 40$	适用于均质球型粒子簇、椭球粒子簇和分层球形形状粒子簇	取决于粒子的数量及尺度大小	• 对于不同状态的入射光,不需要进行重复性计算 • 模型解析,计算精度非常高	• 特别当粒子半径及折射率较大时,数值求解过程存在不稳定性; • 适用的粒子类型相对较少。

为了减小表面积分的复杂度,T 矩阵法目前主要用于旋转对称粒子,如椭球体、有限圆柱体和 Chebysev 粒子^[26];经过 Peterson, et al^[45]及 Lakhtakia, et al^[46]的发展,目前 T 矩阵法也可适用于多面体、多层散射体及球形粒子簇的散射特性模拟。

对于单个均匀粒子,T 矩阵是通过拓展边界条件法(EBCM)进行计算的,但大量数值计算表明,当粒子复折射率的实部或虚部很大、尺度参数较大($x > 20$)或具有极端的几何形状(如轴比很大的椭球粒子)时,EBCM 就会出现数值稳定性及收敛性问题^[22]。Mishchenko 等曾提出一个数学收敛法,但研究表明,T 矩阵法的收敛精度与粒子的尺度和形状有很强的依赖性,且 Mishchenko 的数学收敛法有时会出现散射效率因子大于消光效率因子的现象。为此,许丽生等^[31]提出了一种“物理收敛法”,可避免数学收敛法所遇到的困难。经过 Mishchenko 等学者的努力^[47],T 矩阵算法已经克服了计算大尺度、大轴比粒子散射特性时的数值不稳定性问题,可用于尺度参数达 180 的均匀对称非球形粒子的光散射特性模拟^[5]。

2008 年以来,经过许多学者努力 T 矩阵模型可适用的形状拓展至团簇型气溶胶粒子^[48],许多学者采用该模型应用于烟尘气溶胶粒子散射特性的计算^[49-50]。目前 T 矩阵法的准确性已经过大量验证,是目前最公认的、应用最广泛的非球形散射理论模型之一。我国学者在 T 矩阵法的应用领域也开展了许多研究工作^[15, 17, 51]。

分离变量法(SVM)。首先由 Oguchi^[52]和 Asano, et al^[53]提出,最初只适用于单个、均质且各向同性的椭球形粒子;Voshchinnikov, et al^[54]等对该方法作出重大改进。SVM 的基本原理是用矢量椭球波函数对入射场、内场和散射场进行展开,将其代入到用微分形式的边界条件中,进而导出与未知场展开系数相对应的线性代数方程组,通过求解内场及散射场展开系数获得长/扁椭球的电磁散射特性。Onaka^[55]将该方法应用于核—幔结构的椭球粒子(双层结构)的散射特性模拟;Cooray, et al^[56]对 SVM 方法进行了改进,使之可适用于旋光椭球体;针对椭球粒子群,Schulz, et al^[57]还提出了一种 SVM 的解析解形式。SVM 可非常准确地获取椭球形粒子的散射特性,但值得注意的是,为简化计算,散射场及内部场的矢量椭球波函数展开阶数受限,存在截断误差;当粒子半径及折射率较大时,线性代数方程组的数值求解过程还可能不存在不适定性。此

外,对于强吸收粒子,椭球波矢量函数的计算也是极为困难的。

基于矢量球面波函数的可叠加性,从 SVM 方法出发进一步发展了针对群粒子(粒子簇)的 SM 方法(叠加法,Superposition Method)。目前 SM 法已经可实现均质球型粒子簇、椭球粒子簇和分层球形粒子簇等的散射特性计算,且模拟精度较高^[22]。

点匹配法(PMM, Point Match Method)。与分离变量法和 T 矩阵法不同,在 PMM 方法中,入射场、内场和散射场均采用截断的矢量球面波函数展开;内场和散射场的展开系数是在边界条件约束下,通过在粒子表面选取有限个匹配点导出并求解对应的代数方程组得到,其中,方程未知数的个数与匹配点个数是一致的。PMM 计算结果的有效性取决于 Rayleigh 假设是否成立,即要求粒子外表面和最小外接球之间区域的电场能够采用矢量球面波函数展开,若该假设不成立,其计算结果可能存在偏差,因此 PMM 在使用过程中常出现计算结果不精确或数值计算不稳定的现象。为解决该问题,Morrison, et al^[58], Oguchi, et al^[59], Al-Rizzo, et al^[60]进一步发展了广义 PMM(Generalized PMM, GPMM),在该方法中,匹配点的数目为未知数个数及方程数目的 2 倍,因此所求解的线性方程组是超定的,待求的展开系数可通过最小二乘法求解;相比 PMM 而言,GPMM 计算过程更加稳定,结果更加精确。Joo, et al^[61], Al-Rizzo, et al^[62]进一步提出了 ME-GPMM 方法(multiple-expansion GPMM),该方法可实现大尺度、旋转对称粒子散射特性的准确计算。经过许多学者的努力,虽然点匹配法无论是适用尺度参数和形状等均取得了较大发展,但整体而言,由于 PMM 方法是采用矢量球面波函数对场进行展开的,因此对于形状较复杂的粒子,该算法的不稳定性和困难性大大增加。

3.2 基于体积分方程法的散射模型

体积分方程法需要通过对以下积分方程的求解来模拟散射场,该式描述了一个体积为 V 的粒子对平面波的散射过程^[70-71]。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + k^2 \int_V d^3\mathbf{r}' \left[1 + \frac{1}{k^2} \nabla \nabla \right] \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [m^2(\mathbf{r}') - 1] \mathbf{E}(\mathbf{r}') \quad (1)$$

式中 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 表示总外部电场, $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ 是入射场, k 是波数, $[m^2(\mathbf{r}') - 1] \mathbf{E}(\mathbf{r}')$ 描述的是粒子内部的极化电场。通过上式可直接模拟散射波电场,但由于内

部电场未知,因此该积分过程不可实施,因此体积积分方程方法需要解决的第一个问题就是实现粒子内部各微元处电场的获取,该电场可分为两部分进行模拟,一部分是各微元处的入射电场,另一部分是各微元之间的相互感应电场和自感应电场^[22]。在 $\mathbf{r}'=\mathbf{r}$ 处,该积分方程是存在奇异核的,如何实现该积分过程的数值求解是该方法需要解决的第二个问题,这也就是文献中经常提到的奇异核问题^[22]。针对以上问题,目前发展了两套解决方案,一套是基于微元思想的求解模型,典型代表是矩量法 MoM (Method of Moments)^[66]和 DDA (Discrete Dipole Approximation)^[67,72],DDA 是在 MoM 基础上改进的,其本质差异在于自身感应电场的计算上,因此本文主要介绍 DDA 的发展历程及其特点;另一套是基于传统数学理论的求解方法,典型代表是 FIEM 积分方程法。

DDA 法。DDA 方法最早由 Purcell, et al^[73]提出,经过 Draine, et al^[67,72]的努力和推广,目前 DDA 已成为一种较流行的散射算法。DDA 的主要原理是采用有限个数目的、离散的、相互作用的偶极子阵列来近似实际粒子,从而将对实际粒子散射特性的模拟转化对这些偶极子散射特性的研究由此体积积分方程最终可化简为一个线性方程组,通过高斯消去法或共轭梯度法便可实现散射场的求解。其中 DDA 发展过程中较关键的节点包括:Draine, et al^[67]改进了电偶极子的处理方式,并采用 CGM-FFT (Conjugate Gradient Method together with Fast Fourier Transform)法求解 DDA 模拟过程中的线性矩阵方程,极大减小了其计算复杂度。McClain, et al^[74]及 Singham, et al^[75]将笛卡尔矢量用球坐标矢量重新展开,并基于 Wigner-D 函数发展了一套解析的 DDA 模型,该模型可实现随机取向粒子的散射特性模拟,但该算法复杂度非常高,仅能计算粒径小于 1 个波长的粒子。Varadan, et al^[76]对 DDA 适用范围进行了拓展,使之适用于各向异性和双各向异性的介质。Lakhtakia, et al^[77]从体积积分方程出发,推导了 DDA 的形式,并讨论了它和 MoM 联系,对比了两者的计算性能。

目前主要流行的 DDA 代码是 Draine, et al^[67,78]设计的,并在各领域得到广泛应用。DDA 的主要优点是可适用于具有任意形状、非均匀、各向异性的粒子,且物理概念简单,散射条件能自动满足。与 3.3 节介绍的 FDTD 和 FEM 方法相比,其计算域仅限制在散射体的体积内,因此未知量相对较少。

DDA 的计算精度取决于偶极子的数目,数目越大,计算结果越精确,但内存消耗和计算时间也随之增加,收敛速度也迅速减慢;同时受计算机 CPU 和内存的限制,目前该方法比较适合尺度参数较小的粒子的散射特性模拟,且计算精度不是很高。

FIEM 积分方程法 (Fredholm Integral Equation Method)。FIEM 首先由 Holt, et al^[68]在 1978 年提出,该算法的核心在于通过对内场进行傅里叶变换,将体积积分转化至波数坐标空间上的积分,从而有效去除了积分方程法存在的奇异核问题;进一步将积分离散,化积分为线性方程组,通过代数运算便实现粒子散射场求解。FIEM 算法要求所求解矩阵元素必须是可解析的,因此该模型适用的形状仅包括椭球体、有限圆柱体等,并且针对不同形状粒子,相应的算法差异也很大。Papadakis, et al^[79]、Stamatakis, et al^[80]进一步拓展了 FIEM 法的适用范围,使之可用于各向异性的介电椭球粒子和三维的椭球粒子链。

相比于其他模型,FIEM 的一个巨大的优势在于,它的积分过程仅和粒子尺度参数和形状有关,而与入射光的入射角、偏振状态及粒子复折射率无关,因此入射光状态发生改变时,就不必重复计算了,这是 DDA 和下节提到的 FDTD、MRTD、PSTD 和 FEM 等模型所不具备的。但 FIEM 的缺点也很突出,它只适用于小尺度且复折射率不大的粒子,且模型计算量很大^[22]。虽然 Stamatakis, et al^[80]尝试用该方法计算尺度参数为 36.7 的粒子,但其折射率仅为 1.04。

3.3 基于微元法思想的散射模型

基于微元法思想的散射模型的特点是通过微小网格对包含非球形粒子的空间(通常称为计算域)进行离散,通过求解电磁波传播方程模拟每个网格的电磁场信息,从而实现粒子外部散射场的计算;为了控制计算区域,减小计算变量,同时实现电磁波传播至无限远的近似,这类方法通常需要增加一个强吸收边界,这也是该类方法的一个关键。

时域有限差分法 (FDTD)。FDTD 是直接对 Maxwell 方程组进行数值求解的一种方法,最早由 Yee^[64]开发并倡导,经过 Taflovie, et al^[65]的改进,目前该方法可适用于任意复杂形状的非均质粒子。YANG, et al^[81]首次将该模型运用于大气非球形粒子的散射光及其偏振特性的模拟。FDTD 方法的基本原理是将包含散射粒子的空间网格化,每个网格点上指定电容率、磁导率和电导率等电磁参数以表

征大气粒子的物理属性,然后在时间和空间轴上对电磁场的分量的偏微分算子进行差分离散近似,从而将 Maxwell 旋度方程转化为一组差分方程,并在时间轴上逐步推进求解粒子内部场及散射场^[5, 81]。

在 FDTD 数值计算过程中需要加上一个强吸收边界以保证数值计算的稳定性与可靠性。目前已经发展了许多技术方案^[22],其中较为有代表性的一种方法叫完全匹配边界条件(简称 PML 边界条件),最早由 Berenger^[82]开发,其中出射电磁波吸收的计算是以计算域最外层处介质的吸收为基础的,计算域内具有良导电表面。目前针对 PML 边界,许多学者也进行了大量改进性研究,发展了 CPML(卷积形式的吸收边界)及 UPML 边界(各向异性的吸收边界),这些边界模型吸收效果更佳。

FDTD 优点在于其概念简单和易于实现,避免了积分方程法常见的奇异核问题,也不涉及大型线性方程组的求解,因此, FDTD 更适用于复杂形状、非均质粒子的光散射过程的求解,并已得到广泛的应用^[81]。当然,该模型也存在一系列的局限性,其中计算精度与计算量的矛盾较为突出;一般而言, FDTD 的计算精度依赖于对粒子更精细的描述,即需要更细的网格,而这将大大增加 CPU 的计算量和内存需求(内存需求正比于网格数量),因此,在实际应用中, FDTD 算法只适合于尺度参数 $x < 20$ 的非球形粒子的光散射计算。此外,由于 FDTD 的模拟值随入射波的照射方向、偏振态等参数改变而改变,因此对于不同状态的入射光,需要重复所有的计算过程,这也限制了它的进一步推广应用^[22]。为使 FDTD 能一定程度上减小计算时间,部分学者提出了 ADI-FDTD 算法(交替方向隐式时域有效差分),但这种方法随着时间步长增加,数值色散效应增强,同时由于一次时间迭代过程中,每个分量都要计算存储两遍,因此占用内存较大。

时域有限差分的变种模型(MRTD 和 PSTD)。为克服 FDTD 占用计算机资源的问题, Krumpholz, et al^[83]在 FDTD 基础上进一步发展了基于小波分析方法的多分辨时域方法(MRTD, Multi-Resolution Time Domain),在该模型的采样过程中,每个波长距离上只需要取两个采样点,而为保证计算稳定性, FDTD 法在一个波长内需要取 10 个采样点,因此在所需精度不是很高的条件下,可一定程度上减小模拟过程中的内存消耗,提高运行效率。MRTD 也存在一定的缺陷,由于它是采用时间换取空间的,因此无论选择何种基底函数展开,其时间稳定性比

FDTD 都要苛刻,部分学者借鉴 ADI-FDTD 的思想提出了 ADI-MRTD 方法,可一定程度上摆脱时间稳定性条件的限制。

时域伪谱法 PSTD (Pseudo Spectral Time Domain)方法也是 FDTD 法的一类变种,其基本思想是采用 Fourier 变换及其反变换将空间微商用空间积分变换和谱域积分反变换表示^[84]。由于不存在差分近似,原则上其精度可非常高。与 MRTD 相似,在一个波长区间内,该方法只需要两个采样点,可极大降低内存消耗,其中对于三维散射问题,该方法所需的计算机内存仅为 FDTD 的 1/125。同时由于采用了快速 Fourier 变换技术(FFT),算法的运算效率也大大提升。PSTD 算法设计过程中,重点需要解决两个方面的问题^[84-85]:一是 Gibbs 现象(“吉布斯现象”),这是由于快速傅里叶变换过程中,点圆的三角基函数展开不准确造成的;二是空间介质的不连续导致的 FFT 的运算误差。LIU, et al^[85]、LI, et al^[86]和 YANG, et al^[87]成功克服了这两个问题,并将该模型成功应用于冰晶粒子散射特性的模拟,其中最大粒子尺度参数可达 200,目前基于该模型,他们已经建立了从瑞利散射到几何光学区间冰晶粒子散射特性数据库,并广泛应用于各类辐射传输模式中。

有限元法(FEM, Finite Element Method)。有限元法是通过数值求解矢量 Helmholtz 方程获取散射场的,最早由 Morgan, et al^[63]提出,目前可适用于任意形状、非均质粒子的散射特性模拟。它的基本原理是在计算区域内,将散射体离散为许多体积微元(每个波长区间划分约 10~20 个),通过边界条件的约束,将微分方程组转化为以各微元处的电磁场为未知参数的线性方程组,然后通过 Gauss 消去法(GE)和共轭梯度法(CGM)实现各微元处内场或散射场的求解。为了减少变量个数和内存消耗, FEM 需要在一个有限的区域内进行,因此与 FDTD 方法类似,在计算域的边界处,需要添加强吸收边界条件以抑制电磁波反射。为避免添加吸收边界,实现电磁波传播至无限远的近似, Volakis, et al^[88]提出给 FEM 方法增加一个表面积分方程,但该方法破坏了线性方程组系数矩阵的稀疏性。Morgan, et al^[63]提出了一种单矩法,其改进之处在于设计了一个球形的计算区域,但对于轴比较大的粒子,该方法效率将非常低。

FEM 克服了积分方程法的奇异核问题,但由于其模拟区域不仅仅局限于散射体本身,因此导致其

计算量巨大;同时,由于吸收边界条件的影响,其数值模拟精度不高,计算精度也无法不可控制^[22]。

4 总结与展望

为实现辐射传输过程的准确模拟,提高气候模拟及卫星遥感的精度,准确获取气溶胶光散射信息至关重要。但气溶胶来源广泛,化学组分多样,形状各异,尺度变化范围极大,且存在复杂的混合过程(形成非均质体),这些都给气溶胶光散射研究造成较大困难。目前散射理论及模型研究虽然取得了较大进展,但都存在一定的局限性,如T矩阵法、SVM和GPMM等,虽然具有相对较高的计算效率,但受表面积分或微分方程组求解过程的限制,这些方法主要用于形状较规则的均质型粒子或者分层均质粒子的散射特性模拟,且模拟粒子的尺度参数不能太大;其他方法,如FEM、DDA及FDTD方法虽然可实现任意形状的非均质粒子的散射特性模拟,但受计算稳定性、复杂度及计算机性能的限制,目前只能计算折射率不大且尺度参数较小的粒子,因此目前尚缺少一个可用于计算大尺度参数范围、复杂形状、非均质粒子的统一散射理论模型^[22]。

为解决该问题,目前非球形非均质粒子散射特性的高效模拟已成为国际上研究的一个热点,其中一方面,许多研究者正在努力利用层状粒子模型和EBCM模型发展快速计算方法来处理非球形、非均匀粒子的光散射问题^[31];另一方面,由于FDTD在计算非均质、非球形粒子散射方面的优越性,部分学者尝试借鉴信号处理理论及其它数学方法改进FDTD模型,拓展其适用的范围,发展了PSTD等方法来计算大尺度气溶胶和冰晶的散射特性,目前该类方法也正逐步成为气溶胶光散射研究的重要方向,其中如何提高计算效率、节约物理内存和提高算法稳定性成为这类光散射算法研究关注的重点。

电磁场理论与其它学科领域的融合,特别它是与新数学理念和信息处理方法的结合,极大地促进了目标特性(如后向散射雷达截面、隐身特性等)计算理论与模型的发展,目前,虽然这些新模型主要用于导弹、战斗机及坦克等大目标物在微波波段的散射特性计算,但电磁散射理论在各波段的计算原理基本是一致的,因此可将其借鉴至至大气科学中,并用于气溶胶和冰晶粒子可见近红外波段散射特性的模拟,这对于提高气象目标散射特性模拟水

平也是很有裨益的。

参 考 文 献

- [1] Liou K N, Takano Y. Light scattering by nonspherical particles: Remote sensing and climatic implications. *Atmos. Res.*, 1994, 31: 271-298.
- [2] Emde C, Buras R, Mayer B, et al. The impact of aerosols on polarized sky radiance: Model development, validation, and applications. *Atmos. Chem. Phys.*, 2010, 10: 383-396.
- [3] Dou T, XIAO C, Shindell D T, et al. The distribution of snow black carbon observed in the Arctic and compared to the GISS-PUCCINI model. *Atmos. Chem. Phys.*, 2012, 12: 7995-8007.
- [4] Intergovernmental Panel of Climate Change. *Climate change 2007*, 2007.
- [5] Liou K N. *An introduction to atmospheric radiation*. San Diego: Academic Press, 2002.
- [6] Liou K N, Takano Y, YANG P. Intensity and polarization of dust aerosols over polarized anisotropic surfaces. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 2013, 127: 149-157.
- [7] Hess M, Koepke P, Schult I. Optical properties of aerosols and clouds: the software package OPAC. *Bull. Am. Meteor. Soc.*, 1998, 79(5): 831-844.
- [8] 韩永, 王体健, 饶瑞中, 等. 大气气溶胶物理光学特性研究进展. *物理学报*, 2008, 57(11): 7396-7407.
HAN Yong, WANG Tijian, RAO Ruizhong, et al. Progress in the study of physic-optics characteristics of atmospheric aerosol. *Acta. Phys. Sin. (in Chinese)*, 2008, 57(11): 7396-7407.
- [9] Rozanov A, Rozanov V, Buchwitz M, et al. SCIATRAN 2.0—A new radiative transfer model for geophysical applications in the 175—2 400 nm spectral region. *Adv. Space. Res.*, 2005, 36(5): 1015-1019.
- [10] 胡方超, 王振会, 陈钟荣. 小旋转椭球粒子群轴向往呈正态分布时的散射特性. *高原气象*, 2005, 24(6): 948-955.
HU Fangchao, WANG Zhenhui, CHEN Zhongrong. Scattering properties of polydisperse small spheroid particles under normal distribution of their rotatory axes. *Plateau Meteorology (in Chinese)*, 2005, 24(6): 948-955.
- [11] 郭红, 顾行发, 谢东海, 等. 大气气溶胶偏振遥感研究进展. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34(7): 1873-1880.
GUO Hong, GU Xingfa, XIE Donghai, et al. A review of atmospheric aerosol research by using poarization remote sensing. *Spectrosc. Spect. Anal. (in Chinese)*, 2014, 34(7): 1873-1880.
- [12] 弓洁琼, 詹海刚, 刘大召. 遥感遥测中偏振信息的研究进展. *光谱学与光谱分析*, 2010, 30(4): 1088-1095.
GONG Jieqiong, ZHAN Haigang, LIU dazhao. A review on polarization information in remote sensing detection. *Spectrosc. Spect. Anal. (in Chinese)*, 2010, 30(4): 1088-1095.
- [13] 胡帅, 高太长, 李浩, 等. 大气折射对可见光波段辐射传输特性影响. *物理学报*, 2015, 64(18): 184203.
HU Shuai, GAO Taichang, LI Hao, et al. Influence of atmospheric refraction on radiative transfer at visible light band.

- Acta. Phys. Sin. (in Chinese), 2015, 64(18): 184203.
- [14] HU S, GAO T, LI H, et al. Effect of atmospheric refraction on radiative transfer in visible and near-infrared band: Model development, validation, and applications. *J. Geophys. Res.*, 2016, 121: 2349-2368.
- [15] 胡帅, 高太长, 刘磊. 非球形气溶胶粒子散射特性及其等效 Mie 散射误差分析. *气象科学*, 2014, 34(6): 612-619.
HU Shuai, GAO Taichang, LIU Lei. Analysis on scattering characteristics and equivalent Mie scattering errors of non-spherical atmospheric aerosol. *Journal of the Meteorological Sciences (in Chinese)*, 2014, 34(6): 612-619.
- [16] 范萌, 陈良富, 李莘莘, 等. 非球形气溶胶短波红外散射特性研究. *物理学报*, 2012, 61(20): 2042021-20420211.
FAN Meng, CHEN Liangfu, LI Shenshen, et al. Scattering properties of non-spherical particles in the CO₂ shortwave infrared band. *Acta Phys. Sin. (in Chinese)*, 2012, 61(20): 2042021-20420211.
- [17] 胡帅, 高太长, 刘磊, 等. 偏振光在非球形气溶胶中传输特性的 Monte Carlo 仿真. *物理学报*, 2015, 64(9): 094201.
HU Shuai, GAO Taichang, LIU Lei, et al. Simulation of radiation transfer properties of polarized light in non-spherical aerosol using Monte Carlo method. *Acta Phys. Sin. (in Chinese)*, 2015, 64(9): 094201.
- [18] Herman M, Deuzé J L, Marchand A, et al. Aerosol remote sensing from POLDER/ADEOS over the ocean: Improved retrieval using a nonspherical particle model. *J. Geophys. Res.*, 2005, 110: D10S02.
- [19] Aden A L, Kerker M. Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres. *J. Appl. Phys.*, 1951, 22(10): 1242-1246.
- [20] Hoyningen-Huene W, Posse P. Nonsphericity of aerosol particles and their contribution to radiative forcing. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 1997, 57(5): 651-668.
- [21] Curtis D B, Meland B, Aycibin M. A laboratory investigation of light scattering from representative components of mineral dust aerosol at a wavelength of 550 nm. *J. Geophys. Res.*, 2008, 113: D08210.
- [22] Mishchenko M I, Hovenier J W, Travis L D. light scattering by nonspherical particles theory, measurements, and application. New York: Academic Press, 2000.
- [23] Bohren C, Huffman. Absorption and scattering of light by small particles. 1983.
- [24] Jones A R. Electromagnetic wave scattering by assemblies of particles in the rayleigh approximation. *Proceedings of the Royal Society A*, 1979, 366(1724): 111-127.
- [25] Stevenson A F. Solution of electromagnetic scattering problems as power series in the ratio (dimension of scatterer) / wavelength. *Journal of Applied Physics*, 1953, 24(9): 1134-1142.
- [26] Mishchenko M I, Travis L D. Capabilities and limitations of a current fortran implementation of the *T*-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 1998, 60(3): 309-324.
- [27] Hulst H C. Light scattering by small particles. New York: Wiley, 1957.
- [28] Meeten G H. An anomalous diffraction theory of linear birefringence and dichroism in colloidal dispersions. *Journal of Colloid & Interface Science*, 1982, 87(2): 407-415.
- [29] Khlebtsov N G. Optics of fractal clusters in the anomalous diffraction approximation. *Journal of Modern Optics*, 1993, 40(11): 2221-2235.
- [30] LIU Y, Arnott W P, Hallett J. Anomalous diffraction theory for arbitrarily oriented finite circular cylinders and comparison with exact *T*-matrix results. *Applied Optics*, 1998, 37(21): 5019-5030.
- [31] 许丽生, 陈洪滨, 丁继烈, 等. 非球形粒子光散射计算研究的进展综述. *地球科学进展*, 2014, 29(8): 903-912.
XU Lisheng, CHEN Hongbin, DING Jilie, et al. An overview of the advances in computational studies on light scattering by non-spherical particles. *Advances in Earth Science (in Chinese)*, 2014, 29(8): 903-912.
- [32] Mitchell D L. Parameterization of the Mie extinction and absorption coefficients for water clouds. *J. Atmos. Sci.*, 2000, 57(9): 1311-1326.
- [33] Liou K N, YANG P, Takano Y, et al. On the radiative properties of contrail cirrus. *Geophysical Research Letters*, 1998, 25(8): 1161-1164.
- [34] Stratton J A. Electromagnetic theory. New York: McGraw-Hill, 1941.
- [35] Born M, Wolf E. Principles of optics. Oxford: Pergamon, 1970.
- [36] Liou K N, CAI Q, Pollack J B, et al. Light scattering by randomly oriented cubes and parallelepipeds. *Applied Optics*, 1983, 22(19): 3001-3008.
- [37] 刘西川, 高太长, 刘磊. 基于非球形雨滴的降雨对激光传输衰减的影响. *红外与激光工程*, 2013, 42(1): 167-173.
LIU Xichuan, GAO Taichang, LIU Lei. Effect of rainfall on laser transmission attenuation based on non-spherical raindrops. *Infrared and Laser Engineering (in Chinese)*, 2013, 42(1): 167-173.
- [38] XU L, ZHANG G, DING J, et al. Light scattering by polydispersions of randomly oriented hexagonal ice crystals: Phase function analyses. *Optics*, 1997, 106: 103-114.
- [39] ZHANG J, XU L. Light scattering by absorbing hexagonal ice crystals in cirrus clouds. *Applied Optics*, 1995, 34(25): 5867-5874.
- [40] Hansen J E, Travis L D. Light scattering in planetary atmosphere. *Space Science Reviews*, 1974, 16(4): 527-610.
- [41] Macke A, Mishchenko M I, Carlson K. Scattering of light by large nonspherical particles: Raytracing approximation versus *T*-matrix method. *Optics Letters*, 1995, 20(19): 1934-1936.
- [42] WIELAARD D J, Mishchenko M I, Macke A, et al. Improved *T*-matrix computations for large, nonabsorbing and weakly absorbing nonspherical particles and comparison with geometrical-optics approximation. *Applied Optics*, 1997, 36(18): 4305-4313.
- [43] Waterman P C. Symmetry unitarity and geometry in electromagnetic scattering. *Physical Review*, 1971, 3: 825-839.
- [44] Mishchenko M I, Travis L. Light scattering by polydispersions of randomly oriented spheroids with sizes comparable to wavelengths of observation. *Applied Optics*, 1994, 33(30): 7206-7225.
- [45] Peterson B, Ström S. *T* matrix for electromagnetic scattering from an arbitrary number of scatterers and representations of $E(3)$.

- Phys. Rev. D, 1973, 8: 3661-3678.
- [46] Lakhtakia A, Varadan V K, Varadan V V. Scattering and absorption characteristics of lossy dielectric, chiral, nonspherical objects. *Applied Optics*, 1985, 24: 4146-4154.
- [47] Mishchenko M I, Travis L. T-matrix computations of light scattering by large spheroidal particles. *Optics Communication*, 1994, 109(6): 16-21.
- [48] LIU L, Mishchenko M I, Arnott W P. A study of radiative properties of fractal soot aggregates using the superposition T-matrix method. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2008, 109(15): 2656-2663.
- [49] WU Y, GU X, CHENG T. The single scattering properties of the aerosol particles as aggregated spheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2012, 113(12): 1454-1466.
- [50] CHENG T, GU X, WU Y. The optical properties of absorbing aerosols with fractal soot aggregates; Implications for aerosol remote sensing. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2013, 125: 93-104.
- [51] 高太长, 刘磊, 李浩. 近红外波段气溶胶粒子形状和性质对散射特性的影响. *解放军理工大学学报(自然科学版)*, 2007, 8(3): 302-306.
- GAO Taichang, LIU Lei, LI Hao. Effect of shape and character of aerosol on its near-infrared scattering characteristics. *Journal of PLA University of Science and Technology(in Chinese)*, 2007, 8(3): 302-306.
- [52] Oguchi T. Scattering properties of oblate raindrops and cross polarization of radio waves due to rain—Calculations at 19.3 and 34.8 GHz. *J. Radio. Res. Lab. Jpn.*, 1973, 20: 79-118.
- [53] Asano S, Yamamoto G. Light scattering by a spheroidal particle. *Applied Optics*, 1975, 14(1): 29-49.
- [54] Voshchinnikov N V, Farafonov V G. Optical properties of spheroidal particles. *Astrophysics & Space Science*, 1993, 204(1): 19-86.
- [55] Onaka T. Light scattering by spheroidal grains. *Ann Tokyo Astron Observ*, 1980, 18: 1-54.
- [56] Cooray M F R, Ciric I R. Wave scattering by a chiral spheroid. *Journal of the Optical Society of America A*, 1993, 10(10): 1197-1203.
- [57] Schulz F M, Stamnes, Stamnes J J. Scattering of electromagnetic waves by spheroidal particles: A novel approach exploiting the T matrix computed in spheroidal coordinates. *Applied Optics*, 1998, 37(33): 7875-7896.
- [58] Morrison J A, Cross M J. Scattering of a plane electromagnetic wave by axisymmetric raindrops. *Bell System Technical Journal*, 1974, 53(6): 955-1019.
- [59] Oguchi T, Hosoya Y. Scattering properties of oblate raindrops and cross polarization of radio waves due to rain. II. Calculations at microwave and millimeter wave regions. *J. Radio Res. Lab. Jpn.*, 1974, 21: 191-259.
- [60] Al-Rizzo H M, Tranquilla J M. Electromagnetic scattering from dielectrically coated axisymmetric objects using the generalized point-matching technique. *J. Comput. Phys.*, 1995, 119(2): 356-373.
- [61] Joo K, Iskander M F. A new procedure of point-matching method for calculating the absorption and scattering of lossy dielectric objects. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 1990, 38: 1483-1490.
- [62] Al-Rizzo H M, Tranquilla J M. Electromagnetic wave scattering by highly elongated and geometrically composite objects of large size parameters: The generalized multipole technique. *Appl. Opt.*, 1995, 34(18): 3502-3521.
- [63] Morgan M A, Mei K K. Finite-element computation of scattering by inhomogeneous penetrable bodies of revolution. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1979, 27(2): 202-214.
- [64] Yee K S. Numerical solution of initial boundary value problem involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1966, 14(3): 302-307.
- [65] Taflov A. *Computational electrodynamics: The finitedifference timedomain method*. Norwood, MA: Artech House, 1995:80-230.
- [66] Harrington R F. *Field computation by moment methods*. New York: Macmillan, 1968.
- [67] Draine B T. Discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains. *Astrophysical Journal*, 1988, 333(2): 848-872.
- [68] Holt A R, Uzunoglu N K, Evans B G. An integral equation solution to the scattering of electromagnetic radiation by dielectric spheroids and ellipsoids. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1976, 26(5): 706-712.
- [69] Bruning J H, Lo Y T. Multiple scattering of EM waves by spheres. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1971, 19: 378-.
- [70] Shifrin K S. *Scattering of light in a turbid medium*. Moscow: Gos-tehteorizdat, 1951.
- [71] Bladel J. Some remarks on green's dyadic for infinite space. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1961, 9(6): 563-566.
- [72] Draine B T, Flatau P J. Discretedipole approximation for scattering calculations. *Journal of the Optical Society of America A*, 1994, 11(11): 1491-1499.
- [73] Purcell E M, Pennypacker C R. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains. *Astrophysical Journal*, 1973, 186(2): 705-714.
- [74] McClain W M, Ghoul W A. Elastic light scattering by randomly oriented macromolecules: Computation of the complete set of observables. *J. Chem. Phys.*, 1986, 84(12): 6609-6622.
- [75] Singham S B, Salzman G C. Evaluation of the scattering matrix of an arbitrary particle using the coupled dipole approximation. *J. Chem. Phys.*, 1986, 84(5): 2658-2667.
- [76] Varadan V V, Lakhtakia A, Varadan V K. Scattering by three-dimensional anisotropic scatterers. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1989, 37(6): 800-802.
- [77] Lakhtakia A, Mulholland G W. On two numerical techniques for light scattering by dielectric agglomerated structures. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 1993, 98(6): 699-716.
- [78] Draine B T, Flatau P J. Discrete-dipole approximation for scattering calculations. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1994, 11: 1491-1499.
- [79] Papadakis S N, Uzunoglu N K, Capsalis C N. Scattering of a plane wave by a general anisotropic dielectric ellipsoid. *J. Opt.*

- Soc. Am. A, 1990, 7(7): 991-997.
- [80] Stamatakis G, Uzunoglu N. An integral equation solution to the scattering of electromagnetic radiation by a linear chain of interacting triaxial dielectric ellipsoids. the case of a red blood cell rouleau. J. Electromagn. Waves App., 1997, 11 (7): 949-980.
- [81] YANG P, Liou K N. Light scattering by hexagonal ice crystals; Comparison of finite-difference time domain and geometric optics models. J. Opt. Soc. Am. A, 1995, 12(1): 12.
- [82] Berenger J P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. Journal of Computational Physics, 1994, 114 (2): 185-200.
- [83] Krumpholz M, Katehi L P B. MRTD; New time-domain schemes based on multiresolution analysis. IEEE Transactions on Microwave Theory and Technology, 1996, 44(4): 555-571.
- [84] LIU C, Panetta R, YANG P. Application of the pseudo-spectral time domain method to compute particle single-scattering properties for size parameters up to 200. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 2012, 113: 1728-1740.
- [85] LIU C, Panetta R, YANG P. The effects of surface roughness on the scattering properties of hexagonal columns with sizes from the Rayleigh to the geometric optics regimes. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 2013, 129: 169-185.
- [86] LI H, LIU C, BI L, et al. Numerical accuracy of “equivalent” spherical approximations for computing ensemble-averaged scattering properties of fractal soot aggregates. J. Quant. Spectrosc. Radiat Transfer, 2010, 111: 2127-2132.
- [87] YANG P, Liou K N, BI L, et al. On the radiative properties of ice clouds; Light scattering, remote sensing, and radiation parameterization. Adv. Atmos. Sci., 2015, 32: 32-63.
- [88] Volakis J L, Chatterjee A, Kempel L. Finite element method for electromagnetics. New York: IEEE Press, 1998.